



Физико-технический
институт
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Международная научно-практическая конференция
«Физико-технические проблемы в науке, промышленности и медицине»
Секция 3. Математическое моделирование в фундаментальных и прикладных исследованиях

Добротное освоение азов математического моделирования станет залогом успешного решения практических задач в различных областях будущей профессиональной деятельности.

**РАЗРАБОТКА ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО
ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ**

А.С. Попов, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: asptomsktpu@gmail.com

В настоящее время вопрос о необходимости создания новых материалов, с заранее заданными свойствами, становится наиболее популярным. Несмотря на высокие достижения в области создания наноматериалов и обычных сплавов, задачи расчета перед экспериментом остаются выгодными как экономически, так и во временном плане. Цель настоящей работы – провести исследование методов расчета новых материалов, их существующую реализацию в виде программных продуктов, а также сформировать идеи по созданию высокопроизводительного программного комплекса по расчету свойств новых материалов на основе неэмпирических вычислений (не требующих предварительных экспериментальных данных).

Среди множества методов, позволяющих реализовать вычисления атомных структур, наиболее выделяются методы расчетов из первых принципов (Ab Initio) и методы молекулярной динамики. Вышеупомянутые методы могут использоваться как по отдельности (что приведет к потере точности или увеличению времени расчета соответственно), так и совместно. Выполненный в ходе исследования анализ литературы показал, что наиболее часто используется метод расчетов из первых принципов, а именно теория функционала плотности, где электроны описываются не по отдельности, как единичные, без учета корреляционных эффектов (методы Хартри), а как некий функционал, зависимый от выбранных параметров. Обобщенная схема, включающая в себя вышеупомянутые методы, приведена на рисунке 1. Таким образом, перед тем, как приступить к одному из методов Ab Initio, можно воспользоваться методами молекулярной динамики, полуэмпирическими методами или же взять готовые экспериментальные данные, содержащие геометрические параметры кристаллической решетки (можно пропустить этот шаг, если воспользовался, к примеру, расчетами геометрических параметров решетки с помощью псевдопотенциала). На следующем шаге производится расчет одним из методов и, после проверок, получается результат. В практическом плане полученный результат интересен тем, что на его основе можно рассчитать прочность [1], электронную структуру [2], оптические свойства [3], границы формирования зерен [4], теплопроводность, упругость [5] и многое другое. Таким образом, не приступая к эксперименту, при наличии соответствующего программного комплекса, можно вычислить интересующие свойства материалов с высокой точностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

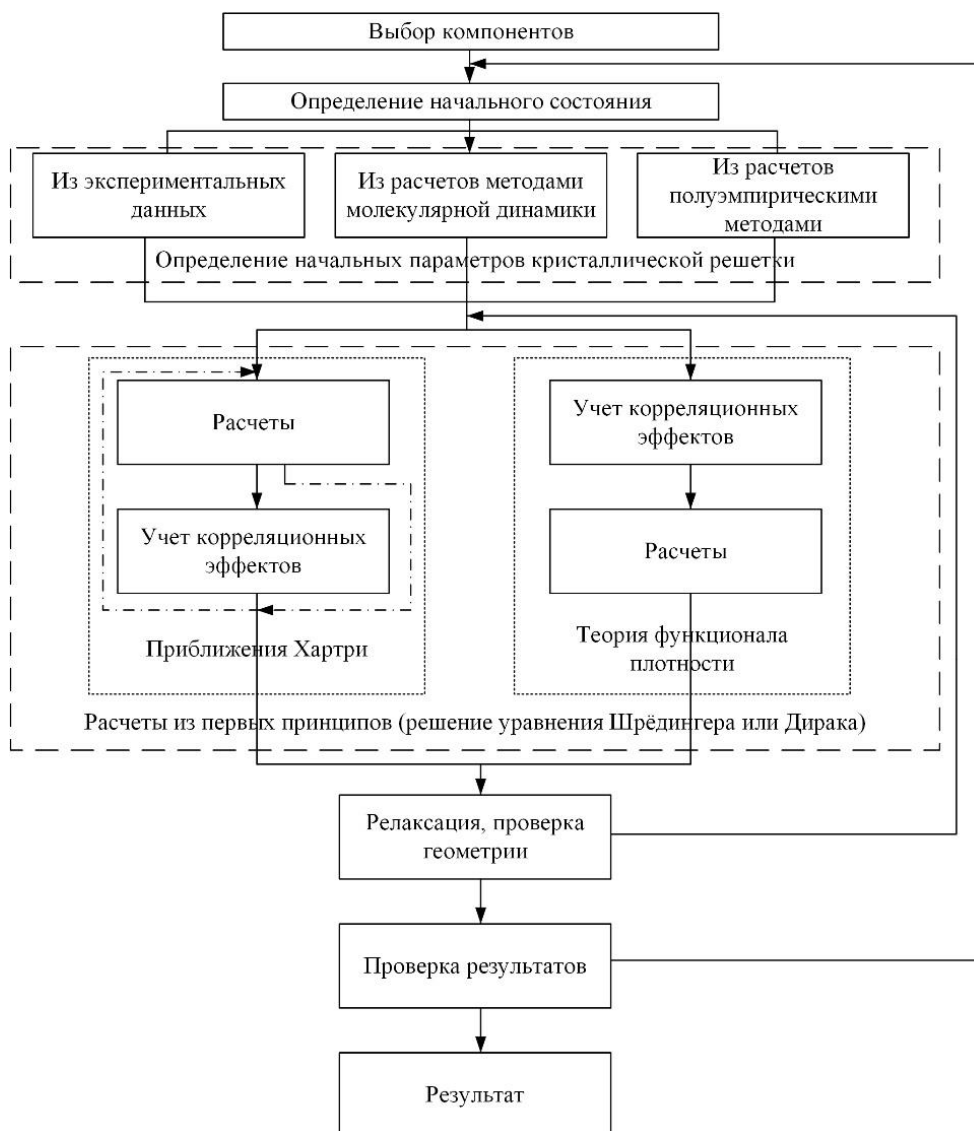


Рисунок 1. Общая схема расчетов атомных структур

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Искандаров А.М., Умено Ё. Теоретическая прочность кремния при сдвиге в широком интервале температур // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т.9. – № 1 – С. 89–93.
- Кравцова А.Н., Гуда А.А., Мазалова В.Л., Солдатов А.В., Джонсон Р.Л. Электронная структура нанокластеров титана: анализ методом теории функционала плотности // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. – 2011. – Т.4. – № 1. – С. 15–22.
- Гажулина А.П., Марычев М.О. Первопринципные расчеты линейных оптических свойств кристаллов тартратов олова, цинка, бария, кобальта, железа, свинца в программном комплексе Wien2k // Физика твердого тела. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2012. – Т.1. – № 1. – С. 37–44.
- Верховых А.В., Мирзоев А.А. Ab Initio моделирование энергии формирования границы зерна в ОЦК-железе // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 77–81.
- Волков-Богородский Д.Б. Аналитико-численный метод оценки эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов // Мезо-, нано-, биомеханика и механика природных процессов. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – Т.2. – № 4. – С. 407–409.